

На правах рукописи

Галимуллин Дамир Зиннурович

РАЗДЕЛЕНИЕ СЛОЖНЫХ СИГНАЛОВ С ПОМОЩЬЮ
ВЕЙВЛЕТ-ПРОИЗВОДНОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ И
БИСПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА

01.04.05 – оптика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Казань – 2006

Работа выполнена на кафедре оптики и нанофотоники
Государственного образовательного учреждения высшего
профессионального образования «Казанский государственный университет
им. В.И. Ульянова-Ленина»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Салахов Мякзюм Халимуллович

Научный консультант: кандидат физико-математических наук,
доцент Харинцев Сергей Сергеевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Нигматуллин Равиль Рашидович

кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник Тарасов Вячеслав
Иванович

Ведущая организация: Томский государственный университет
им. В.В. Куйбышева

Защита состоится «___» декабря 2006 г. в _____ часов на заседании
диссертационного совета Д 212.081.07 в Казанском государственном
университете по адресу: 420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке
им. Н.И. Лобачевского Казанского государственного университета

Автореферат разослан «___» ноября 2006 г.

Ученый секретарь диссертационного совета

Сарандаев Е.В.

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Современная измерительная аппаратура дает возможность не только регистрировать экспериментальные данные, но и производить их первичную обработку с целью извлечения более полной и достоверной информации о физике исследуемого процесса. Это достигается путем включения методов обработки и вычислительной техники в измерительную систему, что позволяет осуществлять комплексную интерпретацию полученного результата.

В прикладной спектроскопии при обработке эксперимента приходится решать задачу выявления сложной структуры сигнала и выделения элементарных компонент. Использование традиционных спектральных и конечно-разностных методов, различных алгоритмов на основе метода наименьших квадратов, особенно при значительном перекрытии составляющих и наличии шума, не всегда позволяет правильно определить их количество и форму. Недостаточность классических методов для обработки спектроскопических данных побуждает использовать и развивать новые математические подходы.

В атомно-силовой микроскопии (АСМ) подобная задача возникает при исследовании колебаний зонда кантилевера в динамическом режиме. Выделение собственных мод осциллятора и использование их при анализе поверхности в воздухе и жидкости позволяет существенно улучшить параметры измерительного прибора. Изучение поведения одного нелинейного осциллятора или их ансамбля традиционно основано на полиспектральном Фурье-анализе. Этот подход применим к большинству изучаемых систем, но только в том случае, если они считаются стационарными в течение некоторого известного промежутка времени. Для реальных систем взаимодействие между локальными подсистемами приводит к временной зависимости характеристических частот. Фазовая связь между когерентными модами осциллятора может значительно

изменяться с течением времени. При исследовании таких данных полиспектральный Фурье-анализ не является эффективным, поэтому требуется разработка метода, позволяющего учесть временную эволюцию коррелированных структур.

Преодолеть некоторые ограничения, присущие существующим методам исследования структуры сложных сигналов, возможно с привлечением методов, основанных на концепции непрерывного вейвлет-преобразования (НВП). В отличие от традиционно применяемого Фурье-преобразования, НВП обеспечивает двумерную развертку одномерного сигнала, позволяющую проводить локальный анализ на различных временных масштабах. Гибкость, заключенная в выборе базисного вейвлета в зависимости от исследуемых данных, позволяет охватить значительный круг задач. Вейвлет-анализ может быть использован как эффективный аналитический инструмент для изучения нестационарных (во времени) или неоднородных (в пространстве) сигналов. Таким образом, исследования, проведенные в диссертационной работе, являются *актуальными и практически значимыми*.

Целью работы является разработка новых методов и привлечение существующих подходов на основе вейвлет-анализа для решения задач разделения сложных спектров на элементарные составляющие и идентификации их формы в случае искажений в исходных данных, выделения когерентных мод зонда кантилевера в атомно-силовой микроскопии и детектирования нелинейных эффектов в сложных нестационарных сигналах.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Поведение нулевых точек вейвлет-проекций спектрального профиля, полученных с использованием базисных вейвлетов Гаусса и Лоренца, позволяет произвести его идентификацию.
2. Метод определения формы линий с использованием базисного вейвлета Лоренца позволяет классифицировать элементарные составляющие

сложного спектрального контура в классе распределений Гаусса, Лоренца, Цаллиса и производить расчет их спектральных параметров.

3. Биспектральный вейвлет-анализ позволяет идентифицировать корреляцию мод и исследовать ее временную динамику в сложных нестационарных сигналах.

Научная новизна работы состоит в следующем:

- Впервые разработан алгоритм определения формы составляющих сложного контура на основе вейвлет-производной спектрометрии. Предложенный подход не требует привлечения информации о далеких крыльях спектрального профиля, что позволило решить ряд задач молекулярной спектроскопии с шумом и искажениями в исходных данных.
- Предложено семейство базисных вейвлетов на основе распределения Лоренца, позволяющих производить идентификацию спектральных линий в классе распределений Лоренца, Гаусса, Цаллиса.
- Разработан новый подход, позволяющий улучшить частотное разрешение биспектрального вейвлет-анализа и исследовать временную динамику квадратичной связи при помощи вейвлета Морле. Данный метод позволяет выявлять когерентные моды осциллятора в случае сложной структуры сигналов.

Достоверность полученных результатов обеспечивается путем тщательной проверки предлагаемых методик и сравнением полученных результатов с математическими методами, показавшими свою эффективность при решении аналогичных задач. Анализ погрешностей восстановления модельных данных, воспроизводимость получаемых решений и подтверждение их экспериментами свидетельствуют о достоверности результатов работы.

Практическая ценность заключается в том, что предложенные методы по определению структуры сигнала и расчету его элементарных компонент могут быть использованы для более качественной и достоверной обработки экспериментальных данных в прикладной

спектроскопии и атомно-силовой микроскопии в случае сложных и нестационарных сигналов.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на VII, VIII Всероссийских и IX, X Международных молодежных научных школах “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия” (Казань, 2003, 2004, 2005, 2006), на общефакультетском научном физическом семинаре КГУ (Казань, 2003), на конференции им.Лобачевского (Казань, 2003), на Международной конференции European Dynamics Days (Palma de Mallorca, Spain, 2003), на Международной конференции “Современные проблемы физики и высокие технологии” (Томск, 2003), на юбилейной научной конференции физического факультета КГУ (Казань, 2004), на VIII Международном симпозиуме по фотонному эхо и когерентной спектроскопии (Калининград, 2005), на итоговой научной конференции КГУ (Казань, 2005), на XLIV Международной научной студенческой конференции “Студент и научно-технический прогресс” (Новосибирск, 2006), на Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам “Ломоносов-2006” (Москва, 2006).

Публикации. По результатам диссертации опубликовано 16 работ в центральной научной печати и сборниках конференций.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Объем работы составляет 153 страницы, включая 82 рисунка и 2 таблицы. Список цитированной литературы содержит 116 наименований.

Краткое содержание работы

Во введении обосновывается актуальность темы исследования, сформулирована цель работы, изложены основные защищаемые положения, показана новизна результатов и их практическая значимость, приведены структура и содержание диссертации.

В первой главе формулируется постановка задачи разложения сложного сигнала на компоненты, описываются основы методов решения поставленной задачи в прикладной спектроскопии и особенности

выделения когерентных мод осциллятора с использованием полиспектрального Фурье-анализа. Рассматривается подробно статистика высших порядков и различные схемы разложения спектров с неразрешенной структурой. Излагается современное состояние теории вейвлет-анализа в объеме, необходимом для решения поставленных задач. В результате подробного анализа этих методов даются рекомендации по их применению при обработке различных сигналов.

Вторая глава посвящена решению задачи разложения сложного контура на составляющие и расчета их спектральных параметров в случае белого шума при помощи вейвлет-производной спектрометрии (ВПС).

Излагается подробно метод ВПС [1-4] с использованием семейства вейвлетов Гаусса, основанный на свойстве коммутирования операции дифференцирования и НВП:

$$W(a,b)\left[\partial_t^n[f(t)]\right]=(-1)^n\int_{-\infty}^{\infty}f(t)\partial_t^n\left[\psi_{a,b}^*(t)\right]dt, \quad (1)$$

что позволяет перейти от дифференцирования исходной функции $f(t)$ к дифференцированию вейвлета $\psi_{a,b}(t)=(1/\sqrt{a})\psi[(t-b)/a]$.

Рассмотрено аналитическое выражение НВП контура Гаусса с использованием вейвлета Гаусса 2-го порядка и проведен его подробный анализ. Основным достоинством непрерывного ВА является его избыточность – количество используемых при анализе масштабов неограниченно. На основе результатов проведенного анализа и свойства избыточности НВП предложен подход по идентификации спектрального профиля контура Гаусса и расчету его спектральных параметров [5-10] по поведению нулевых точек вейвлет-проекций в зависимости от масштабов (рис.1). Для идентификации контура Лоренца было использовано семейство вейвлетов Лоренца [6-8] и рассчитано аналитическое выражение для коэффициентов вейвлет-преобразования лоренциана с использованием данного семейства вейвлетов. Показано, что зависимость координаты нулевой точки проекции НВП контуров Гаусса и Лоренца от масштаба является линейной в случае использования предложенного семейства

вейвлетов Лоренца (рис.2). Рассмотрено распределение Цаллиса, включающее в себя в общем случае распределения Лоренца и Гаусса. Проведенные исследования показали [6-13], что предложенное семейство вейвлетов Лоренца позволяет провести идентификацию контуров в классе распределений Гаусса, Лоренца, Цаллиса по углу наклона прямой, аппроксимирующей зависимость координаты нулевой точки вейвлет-проекции от масштаба. Также показано, что для построения аппроксимирующей прямой не требуется привлечение далеких крыльев спектрального контура.

С учетом проведенных исследований предложен алгоритм по идентификации и расчету спектральных параметров компонент сложного профиля [6-10]. Известно, что шумовая составляющая сигнала сосредоточена на малых масштабах его НВП [9, 12]. Поскольку операция численного дифференцирования реальных экспериментальных данных представляет собой обратную некорректную задачу [1-3, 5], то использование ВПС позволяет обойти неустойчивость операции дифференцирования в вейвлет-пространстве путем отсечения малых масштабов. В работах [6-8, 10] дается оценка оптимального рабочего диапазона масштабов путем анализа ошибок при расчете полуширины контура и угла наклона аппроксимирующей прямой в зависимости от уровня белого шума. Произведено сравнение результатов работы алгоритма в случае отсечения

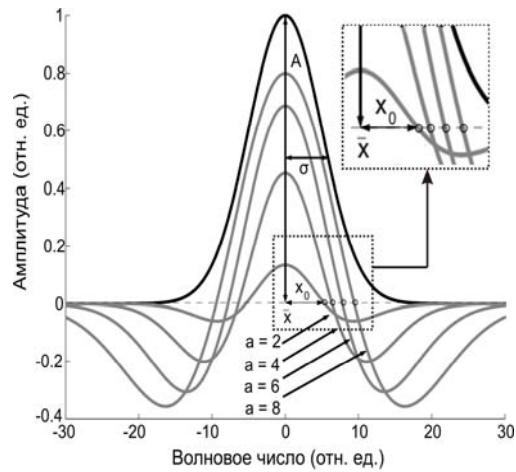


Рис.1. Вейвлет-преобразование гауссиана для разных масштабов a .

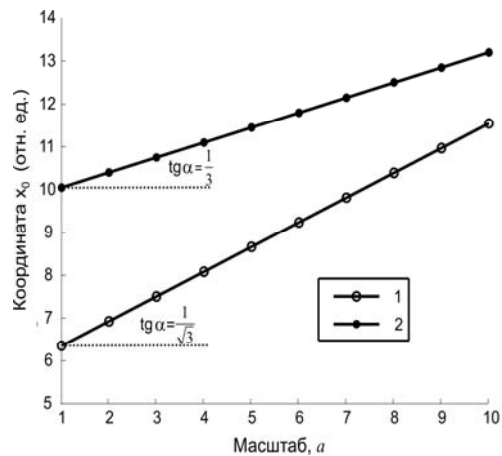


Рис.2. Зависимость значения x_0 от масштаба a для лоренциана (1) и гауссиана (2).

малых масштабов и при использовании всех масштабов. Показано, что использование подхода с выбором оптимального диапазона масштабов позволяет существенно увеличить устойчивость предложенного метода к влиянию случайного шума [10, 12].

Для модельного дублета исследовано взаимное влияние компонент на расчет полуширины и угла наклона прямой, аппроксимирующей зависимость координаты нулевой точки от масштаба. Показано, что относительная ошибка расчета не превышает 10% для компонент, находящихся на расстоянии порядка полторы их относительной полуширины, что является приемлемым для большинства спектроскопических задач [6, 10].

Проведена апробация методики для решения задач детектирования сложной структуры и определения параметров элементарных компонент в ИК спектрах различных соединений [5-14]. Определено количество полос и восстановлены компоненты (рис.3) дублета в ИК-спектре диоксана в области $1340-1400\text{ см}^{-1}$.

С помощью разработанного подхода удалось определить количество полос и их форму в ИК спектре полиэфимида PI-3. Установлено, что в исследуемом диапазоне спектр состоит из пяти компонент. Для определения формы слабых по интенсивности полос I-V, по сравнению с окружающими полосами, проводилась предварительная обработка спектра (рис.4) в

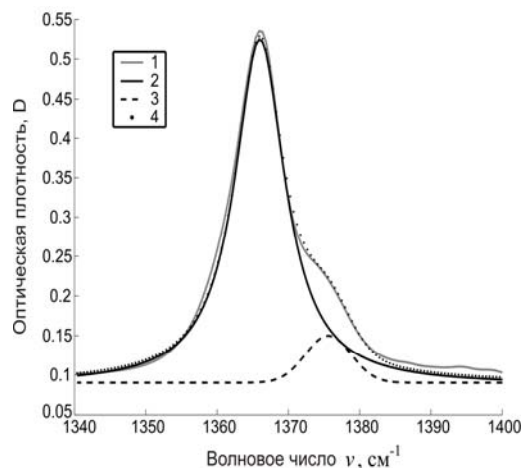


Рис.3. Восстановление дублета:
1 – исходный контур,
2, 3 – рассчитанные компоненты,
4 – реконструированный профиль.

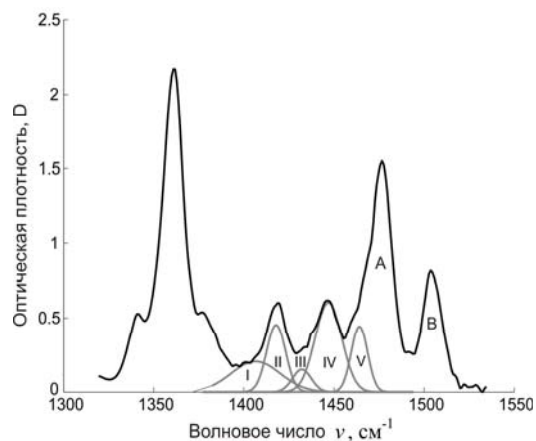


Рис.4. ИК спектр полиэфимида PI-3.

диапазоне $1440-1530 \text{ см}^{-1}$. После расчета формы полос А, В и их спектральных параметров производилось вычитание данного участка из общего спектра, что позволило реконструировать форму полос на исследуемом спектральном диапазоне $1400-1470 \text{ см}^{-1}$ (рис.4). На основе полученных результатов о количестве и форме компонент рассчитаны параметры каждой компоненты спектра, что позволяет производить конформационный анализ данного соединения [13, 14].

В третьей главе рассматривается бикогерентное вейвлет-преобразование и особенности его численной реализации. Введен в рассмотрение базисный вейвлет Морле и показана связь между масштабом и центральной частотой его Фурье-образа. Рассмотрены подробно различные, ранее не учитывавшиеся, эффекты, возникающие при расчете НВП с использованием вейвлета Морле. Получено выражение для коэффициентов НВП гармонического сигнала $\exp(iw_1 t)$ с временем существования T [15]:

$$W(w, b) = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{w_0}{w} \exp(iw_1 b) \exp\left(-\frac{1}{2} w_0^2 \left(\frac{w_1}{w} - 1\right)^2\right) \times \\ \times \left(\operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{2} \frac{w}{w_0} (b+T)\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{2} \frac{w}{w_0} (b-T)\right) \right), \quad (2)$$

где функция $\operatorname{erf}(x)$ представляет собой функцию ошибки.

Из полученного выражения следует, если две частоты разнесены на большой интервал или, наоборот, находятся достаточно близко друг к другу, то возможна потеря информации об их количестве и времени существования. В первом случае, это будет происходить из-за несоизмеримости амплитуд спектральных линий, удовлетворяющих соотношению:

$$\frac{A_1}{A_2} \sim \sqrt{\frac{w_2}{w_1}}, \quad (3)$$

во втором случае, из-за взаимного их перекрытия вследствие уширения спектральной линии на спектрограмме с ростом частоты.

Показано, что основной недостаток при использовании обычного НВП заключается в том, что если ряд имеет достаточно узкий или,

наоборот, широкий спектральный состав, то его биспектральный анализ может быть существенно затруднен. Предложена модификация вейвлета Морле путем введения управляющего параметра – параметра полуширины σ , следующим образом [15, 16]:

$$\psi(x) = \exp(iw_0x) \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right), \quad (4)$$

что позволяет повысить частотную избирательность базисных функций в исследуемом спектральном диапазоне. Эффективность предложенного подхода проиллюстрирована на сигналах, моделирующих отклик системы с квадратичной нелинейностью. Разработан алгоритм выбора значения σ на основе анализа Фурье-спектра исходного сигнала. Для анализа временной динамики квадратичной связи введена функция развертки биспектра во времени [16]:

$$R(w_1, w_2, b) = W(w_1, b)W(w_2, b)W^*(w, b), \quad (5)$$

где w удовлетворяет условию суммирования частот. Ее использование позволяет выделять временную локализацию когерентных структур и определять характерный временной масштаб нелинейности.

Рассмотрены общие закономерности, приводящие к возникновению квадратичной и кубической связи, на примере оптического осциллятора и произведена их классификация. На основе предложенного подхода исследована динамика осциллятора с квадратичной нелинейностью в присутствии внешней вынуждающей силы. Произведен анализ влияния величины расстройки между частотой накачки и собственной частотой колебаний осциллятора на картину биспектра.

Четвертая глава посвящена апробации предложенного подхода для решения задачи детектирования квадратичной нелинейности и выделения когерентных мод в спектре процесса колебаний зонда кантилевера АСМ в динамическом режиме. На рис.5 приведен исследуемый сигнал, представляющий запись колебаний кантилевера CSG12 в бесконтактном динамическом режиме на малом временном интервале. С помощью разработанного алгоритма (рис.6) на основе биспектрального вейвлет-анализа удалось выявить сложную структуру колебательного процесса зонда АСМ в присутствии внешней силы, определить присутствующие в спектре когерентные моды осциллятора и оценить характерный временной масштаб квадратичной связи [15]. На основе полученных данных можно произвести [16] расчет собственных мод зонда кантилевера, что позволяет использовать их при съеме топографии поверхности динамическими методами АСМ и исследовании взаимодействия зонда и образца

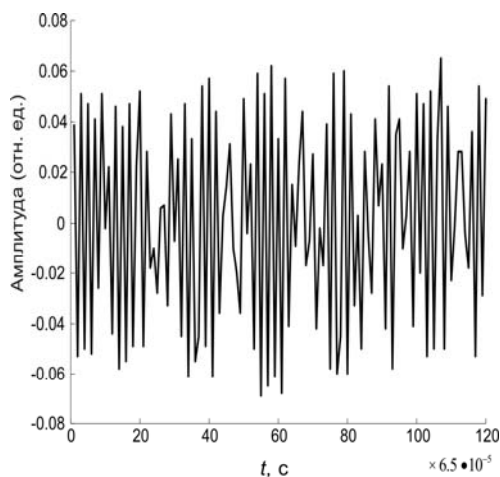


Рис.5. Процесс колебаний зонда кантилевера АСМ в бесконтактном режиме.

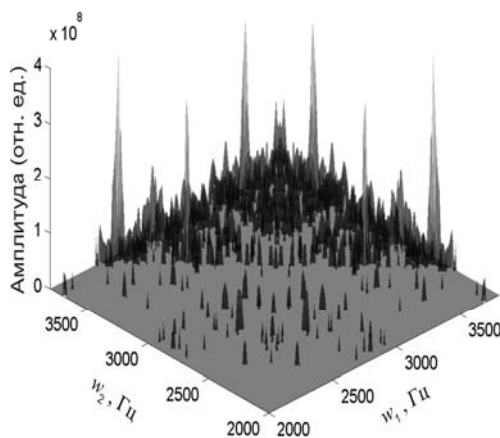


Рис.6. Вейвлет-биспектр исследуемого процесса колебаний зонда кантилевера АСМ.

Основные результаты и выводы

1. Разработан новый метод определения формы спектральных линий на основе вейвлет-производной спектрометрии. Данный подход позволяет идентифицировать профили в классе распределений Гаусса, Лоренца, Цаллиса. Показано, что предлагаемый подход может быть использован для определения формы составляющих полос в сложных спектрах.
2. Предложено семейство вейвлетов на основе распределения Лоренца и показано, что использование данного семейства позволяет значительно упростить процедуру идентификации по нулевым точкам вейвлет-проекций.
3. Разработанная методика была успешно применена к анализу температурных зависимостей интенсивностей и полуширин составляющих в сложных ИК-спектрах полиэфиримидов. Полученные при помощи предложенного подхода оценки подвижности CH_3 - и CF_3 -групп могут быть использованы при обсуждении механизмов диффузии малых молекул в полиэфиримидах. Решен ряд задач определения количества и формы полос модельных и экспериментальных ИК-спектров.
4. Предложен подход по улучшению частотного разрешения биспектрального вейвлет-анализа путем введения параметра полуширины для вейвлета Морле и показано, что для случая сигналов со сложным спектральным составом возможно детектирование нелинейных эффектов. Введена функция развертки биспектра, позволяющая изучать временную динамику квадратичной связи и производить оценку характерного временного масштаба нелинейности. Апробация предложенного подхода при обработке модели осциллятора с квадратичной нелинейностью показала его эффективность при определении связанных частот.
5. Проведен анализ колебаний зонда кантилевера атомно-силовой микроскопии в динамическом режиме. Выявлено, что в процессе колебаний присутствует несколько квазипериодических режимов и существует ряд когерентных мод.

Список авторской литературы

1. Галимуллин, Д.З. Производная спектрометрия сложных молекулярных спектров на основе вейвлет-анализа / Д.З. Галимуллин, С.С. Харинцев, М.Х. Салахов // VII Всероссийская Молодежная Научная Школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: сб. ст. – Казань, 2003. – С.371-377.
2. Галимуллин, Д.З. Метод вейвлет-производной спектрометрии для увеличения разрешения сложных молекулярных спектров / Д.З. Галимуллин, С.С. Харинцев // Труды общефакультетского научного физического семинара студентов: сб. науч. тр. / под общ. ред. Р.Х. Гайнутдинова. – Выпуск IV, Казань, 2003. – С. 117-122.
3. Галимуллин, Д.З. Сравнительный анализ методов производной спектрометрии / Д.З. Галимуллин, М.Э. Сибгатуллин // VIII Всероссийская Молодежная Научная Школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: сб. ст. – Казань, 2004. – С.327-333.
4. Галимуллин, Д.З. Исследование спектра излучения нейтральных атомов меди в диапазоне длин волн 300 нм – 350 нм в условиях импульсного капиллярного разряда в воздухе / Д.З. Галимуллин, Г.Г. Ильин, Е.В. Сарандаев // VIII Всероссийская Молодежная Научная Школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: сб. ст. – Казань, 2004. – С.121-127.
5. Галимуллин, Д.З. Регуляризация обратных некорректных задач в прикладной спектроскопии / Д.З. Галимуллин, М.Э. Сибгатуллин, С.С. Харинцев, М.Х. Салахов // Известия РАН, серия физ. – 2006. – Т.70, №4. – С.538-539.
6. Galimullin, D.Z. Band shape determination with robust estimator based on continuous wavelet transform / S.S. Kharintsev, D.Z. Galimullin, A.Yu. Vorob'ev, M.Kh. Salakhov // Spectrochimica Acta Part A. – 2006. – № 65. – P. 292-298.
7. Галимуллин, Д.З. Определение структуры сложного контура с учетом влияния случайного шума / Д.З. Галимуллин, А.Ю. Воробьев, М.Э. Сибгатуллин, С.С. Харинцев, М.Х. Салахов // IX

- Международная Молодежная Научная Школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: сб. ст. – Казань, 2005. – С.197-201.
8. Галимуллин, Д.З. Разложение сложного контура на элементарные полосы с помощью вейвлет-производной спектрометрии / Е.А. Бондарева, Д.З. Галимуллин, М.Э. Сибгатуллин // IX Международная Молодежная Научная Школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: сб. ст. – Казань, 2005. – С.263-267.
 9. Галимуллин, Д.З. Детектирование детерминированной компоненты в оптических спектрах / Г.В. Фролова, М.Э. Сибгатуллин, Д.З. Галимуллин, С.С. Харинцев, Г.Г. Ильин, М.Х. Салахов // IX Международная Молодежная Научная Школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: сб. ст. – Казань, 2005. – С.279-283.
 10. Galimullin, D.Z. Spectral line shape identification with continuous wavelet transform / D.Z. Galimullin, M.E. Sibgatullin, A.Yu. Vorob'ev, D.I. Kamalova, S.S. Kharintsev, M.Kh. Salakhov // Proc. SPIE. – 2006. – № 6181. – P. 181-189.
 11. Галимуллин, Д.З. Исследование периодических сигналов с фрактальным гауссовым шумом / М.Э. Сибгатуллин, Д.З. Галимуллин, А.Ю. Воробьев, С.С. Харинцев, И.Ф. Бикмаев, М.Х. Салахов // IX Международная Молодежная Научная Школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: сб. ст. – Казань, 2005. – С.107-111.
 12. Galimullin, D.Z. Noise elimination from stellar spectra / M.E. Sibgatullin, D.Z. Galimullin, S.S. Kharintsev, I. F. Bikmaev, M. Kh. Salakhov // Proc. SPIE. – 2006. – № 6181. – P. 191-197.
 13. Галимуллин, Д.З. Изучение внутреннего вращения полиэфиримидов по ИК-Фурье спектрам / Д.З. Галимуллин, Д.И. Камалова, И.М. Колядко, А.Б. Ремизов, М.Х. Салахов // Ученые Записки КГУ. – 2006. – Т.148, кн. 1. – С. 99-109.
 14. Галимуллин, Д.З. Изучение конформационных особенностей полиэфиримидов по ИК-Фурье спектрам / Д.З. Галимуллин, Д.И. Камалова, А.Б. Ремизов, М.Х. Салахов // IX Международная

Молодежная Научная Школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: сб. ст. – Казань, 2005. – С.93-99.

15. Галимуллин, Д.З. Биспектральный анализ нелинейных эффектов при исследовании движения кантилевера в динамическом режиме / Д.З. Галимуллин, М.Э. Сибгатуллин, М.Х. Салахов, А.П. Чукланов, А.А. Бухараев // Электронный журнал “Исследовано в России”. – 2006. – № 125. – С. 1188-1197. <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2006/125.pdf>
16. Галимуллин, Д.З. Биспектральный анализ нелинейных эффектов при исследовании колебаний кантилевера в динамическом режиме / Д.З. Галимуллин, А.П. Чукланов, А.А. Бухараев, М.Х. Салахов // X Международная Молодежная Научная Школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”: сб. ст. – Казань, 2006. – С. 63-66.